Université Abdelmalek Essaadi

Faculté des Sciences et Techniques
Tanger

Année Universitaire 2011-2012
MIPCI 5 ,7
GEGM I 1

Module C111/2 : ATOMISTIQUE
Série 3

EX 1

L'expression de la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène $\Psi_{1s} = C\, e^{-r/a_0}$: a_0 étant le rayon de Bohr

1- Quelle est la signification physique de ψ^2 de cette fonction d'onde.
2- Exprimer la probabilité de présence dP de l'électron à l'intérieur d'un élément de volume compris entre deux sphères de rayon r et r + dr.
3- Définir la densité radiale et donner son expression. Pour quelle valeur de r la densité radiale est maximale
4- Tracer la courbe de la densité radiale en fonction de r.
5- Calculer la constante C en utilisant la condition de normalisation de la fonction Ψ_{1s}.

EX2

1- Indiquer la couche et la sous couche correspondante à chacun des cas suivants :
a) n = 3, l = 1 b) n = 4, l = 2 c) n = 4, l = 0 d) n = 5, l = 3

2- Quelles sont parmi les séries suivantes de nombres quantiques celles qui représentent l'état d'un électron dans un atome
a) n = 0 , l = 0 , m = 0 , s = +½ b) n = 1 , l = 1 , m = 0 , s = + ½

c) n = 1 , l = 0 , m = 0 , s = - ½ d) n = 2 , l = 1 , m = 2 , s = + ½

e) n = 2 , l = 1 , m = -1 , s = + ½

3- Quel est le nombre des différentes orbitales atomiques dans chacun des sous couches suivantes :

a) 3d b) 4f c) 4p d) 5s

EX3

1- Donner la configuration électronique de Al (Z = 13) dans son état fondamental (placer les électrons dans les cases quantiques).

2- Indiquer les valeurs des quatre nombres quantiques caractérisant les électrons de la couche de valence de Al.

3- Calculer l'énergie de chacun des électrons de Al dans son état fondamental. En déduire l'énergie totale de Al.

4- Calculer l'énergie de l'ion Al^{3+} dans son état fondamental.

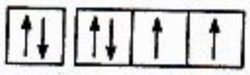
ETUSUP .com

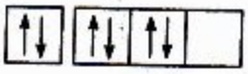
EX4

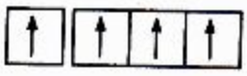
1- Donner parmi les configurations électroniques suivantes, celles qui représentent un état fondamental. Justifier.

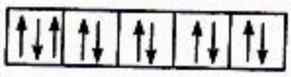
a) $1s^2 1p^6 2s^2$ b) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ c) $1s^2 2s^3$ d) $1s^2 2s^2 2p^4$ e) $1s^2 2s^2 2p^6 2d^{10} 3s^2$

2- Les configurations électroniques suivantes sont elles correctes, sinon donner la règle non respectée.

a) $2s^2 2p^4$ 

b) $2s^2 2p^4$ 

c) $3s^1 3p^3$ 

c) $4d^{11}$ 

EX5

1- Etablir, à l'aide de la règle de Klechkowski , la structure électronique du Ti (Z= 22) dans son état fondamental.

2- Donner l'expression de l'énergie totale correspondante à la configuration : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4$

3- En déduire la structure réelle adoptée par le Ti.

ETUSUP .com

SERIE N° 3.

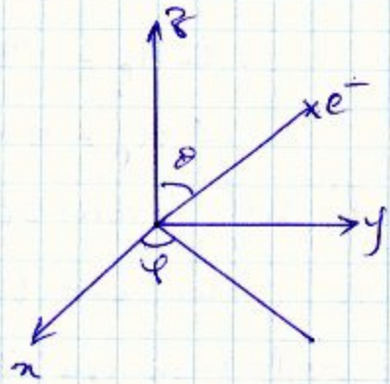
Ex 1 : $\varphi_{1s} = C.e^{-r/a_0}$ a_0 : le rayon de Bohr.

$a_0 = 0,53$ Å $(n=1)$.

1. $\psi(x,y,z)$ ou $\psi(r,\theta,\varphi)$ une fct d'onde ou une orbitale associée à un e^- $|\psi|^2$ détermine la probabilité de trouver l'e^- dans un élément de volume dv.

$dP = \psi^2 . dV$.

2.



$dP = \psi^2 . dv$.

On a une sphère $V = \frac{4}{3}\pi . r^3 \Rightarrow dv = 4\pi r^2 . dr$.

$dP = C^2 . e^{-2r/a_0} \times 4\pi r^2 . dr$

3°). La densité radiale de la probabilité : $D_r = \frac{dP}{dr}$

Sa valeur pour une distance r donnée permet de connaître à quelle distance du noyau, l'e^- se trouve la plus souvent.

$D(r) = 4\pi . C^2 . r^2 . e^{-2r/a_0}$

pour connaître la valeur de r pour laquelle $D(r)$ est maximale, il faut trouver pour qu'elle valeur de r, $D(r)$ s'annule.

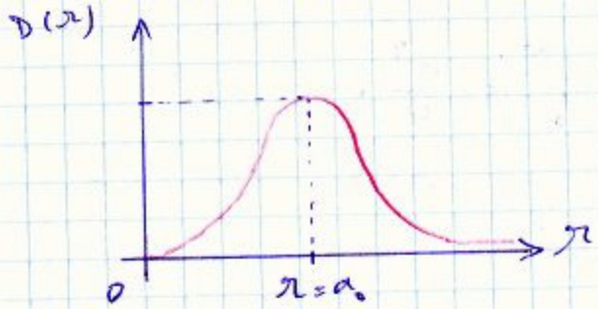
$D'(r) = 8\pi C^2 r \left(1 - \frac{r}{a_0}\right) . e^{-r/a_0}$.

$D'(r) = 0 \Rightarrow r = 0$, $r = a_0$, $r = \infty$

ETUSUP .com

r	0		a_0		∞
$D'(r)$		$+$	0	$-$	
$D(r)$		$\nearrow$		$\searrow$	

4). La densité radiale $D(r)$ est maximale pour $r = a_0$.



5). La condition de normalisation de φ_{1s}

$$dP = \int_0^\infty \varphi_{1s}^2 \, dV = 1.$$

Cette intégrale indique que l'e^- se trouve quelque part dans l'espace.

$$dP = 4\pi C^2 r^2 . e^{-2r/a_0} . dr.$$

$$\int_0^\infty 4\pi C^2 r^2 . e^{-2r/a_0} . dr = 1.$$

$$4\pi C^2 \int_0^\infty r^2 . e^{-2r/a_0} . dr = 1.$$

on pose $I = \int_0^\infty r^2 . e^{-2r/a_0} . dr.$

pour calculer I, on intègre par parties.

Rappel : $\int_{x_1}^{x_2} f(x) . g'(x) . dx = [f(x) . g(x)]_{x_1}^{x_2} - \int_{x_1}^{x_2} f'(x) g(x) dx$

on pose $f(r) = r^2 \Rightarrow f'(r) = 2r.$

$$g'(r) = e^{-2r/a_0} \Rightarrow g(r) = -\frac{a_0}{2} . e^{-2r/a_0}$$

$$I = \underbrace{\left[r^2 \times -\frac{a_0}{2} . e^{-2r/a_0} \right]_0^\infty}_{\to 0} - \int_0^\infty 2r \times -\frac{a_0}{2} . e^{-2r/a_0} . dr$$

$$I = a_0 \int_0^\infty r . e^{-2r/a_0} . dr.$$

ETUSUP .com

$f(r) = r \Rightarrow f'(r) = 1.$

$g'(r) = e^{-2r/a_0} \Rightarrow g(r) = -\frac{a_0}{2} \cdot e^{-2r/a_0}$

$I = a_0 \left(\left[r \times -\frac{a_0}{2} \cdot e^{-2r/a_0} \right]_0^\infty - \int_0^\infty -\frac{a_0}{2} \cdot e^{-2r/a_0} \cdot dr \right.$

$I = \frac{a_0^2}{2} \int_0^\infty e^{-2r/a_0} \, dr.$

$I = \frac{a_0^2}{2} \left[-\frac{a_0}{2} e^{-2r/a_0} \right]_0^\infty = \frac{a^3}{4}.$

On a $4\pi c^2 I = 1.$

$c = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$

$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \cdot e^{-r/a_0}$

EX2 :

L'état d'un e^- est déterminé par la connaissance de quatre (4) nbres quantiques n, l, m et s.

$n = 1, 2, \ldots$ $\quad 0 \leq l \leq n-1.$ $\quad -l \leq m \leq +l$

$s = \pm \frac{1}{2}$ $\quad m$ peut prendre $2l+1$ valeurs.

a). $n = 3$ — couche M.

$l = 1$ — sous couche p.

on a l'orbitale 3p.

b). $n = 4$, $l = 2$.

$\downarrow$ couche N, $\downarrow$ sous couche d $\Big\} \Rightarrow$ 4d.

c). $n = 4$, $l = 0$

$\downarrow$ couche N, $\downarrow$ sous couche s $\Big\} \Rightarrow$ 4s

d). $n = 5$, $l = 3$

$\downarrow$ couche O, $\downarrow$ sous couche f $\Big\} \Rightarrow$ 5f.

ETUSUP .com

2). a). $n=0$, $l=0$, $m=0$, $s=+\frac{1}{2}$.

incorrect $n \neq 0$.

b). $n=1$, $l=1$, $m=0$, $s=+\frac{1}{2}$.

incorrect, $n=1 \Rightarrow l=0$.

c). $n=1$, $l=0$, $m=0$, $s=-\frac{1}{2}$.

correct (il se presente un état d'é).

d). $n=2$, $l=1$, $m=2$, $s=+\frac{1}{2}$.

incorrect. $l=1 \Rightarrow m=-1, 1, 0$.

e). $n=2$, $l=1$, $m=-1$, $s=+\frac{1}{2}$.

correct.

3). le nbre d'orbitale A du m̂ type est égale au nbre de valeurs que peut prendre m qui vaut $2l+1$.

a). 3d :

$n=3$, $l=2$, $m=-2, -1, 0, 1, 2$.

5 OA (d). □□□□□

b). 4f :

$n=4$, $l=3$, $m=-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3 \Rightarrow 7$ OA (f).

□□□□□□□

c). 4P : $n=4$, $l=1$

$m=-1, 0, 1$. □□□

5S $n=5$ $l=0$ $m=0$. □

ETUSUP .com

ETUSUP.com

Programmation
Cours
Informatique
Optique
Chimie
Algébre
Corrigés
Mathématiques
Travaux Pratiques
Electricité
Physique
Résumés
Analyse
Diapo
Exercices
Livres
Contrôles Continus
Langues
MTU
Mécanique
Thermodynamique
Divers
Multimedia
Economie
Travaux Dirigés
Droit
Chimie Organique

et encore plus..